

SEI/UFU - 2830125 - Ficha de Componente Curricular



Ficha de Componente Curricular

CÓDIGO:		COMPONENTE CURRICULAR:	
PQ117		Fotoquímica Inorgânica	
UNIDADE ACADÊMICA OFERTANTE:		SIGLA:	
Programa de Pós-Graduação em Química		PPGQUI	
CH TOTAL TEÓRICA:	CH TOTAL PRÁTICA:	CH TOTAL:	
60 horas	0	60 horas	
CATEGORIA:	CURSO(S):		
Optativa	Mestrado e Doutorado		

OBJETIVOS

Objetivo geral: O curso visa introduzir conceitos básicos de fotoquímica molecular, em especial a de complexos metálicos e óxidos semicondutores.

Objetivos específicos: Durante o curso, o aluno deverá correlacionar os conceitos prévios de teoria de ligação e geometria molecular ao processo de absorção de luz e formação do estado excitado. Os diferentes processos de desativação do estado excitado serão estudados utilizando as teorias correntes e os métodos experimentais utilizados para a investigação desses processos serão descritos e exemplificados. Exemplos de dispositivos

moleculares fotoinduzidos baseados em compostos inorgânicos serão citados, de forma a demonstrar a aplicabilidade da fotoquímica em diferentes situações. Espera-se que, ao final do curso, o aluno possa utilizar os métodos e conceitos da fotoquímica molecular como ferramenta na elucidação/desenvolvimento de diferentes processos.

Ementa

1. Princípios de fotoquímica molecular: estados eletrônicos; processos de desativação do estado excitado;
2. Aspectos Cinéticos e Termodinâmicos da fotofísica de compostos de coordenação e óxidos metálicos: luminescência, transferência de energia, supressão de luminescência;
3. Aspectos Cinéticos e Termodinâmicos da fotoquímica de compostos de coordenação e óxidos metálicos: reações de fotosubstituição, fotoisomerização e transferência de elétrons fotoinduzidas;
4. Métodos experimentais para o estudo das propriedades fotoquímicas e fotofísicas;
5. Aplicações da Fotoquímica Inorgânica em catálise e conversão de energia.

PROGRAMA

1. Princípios de fotoquímica molecular
 - a. Introdução: processos térmicos versus processos fotoinduzidos
 - b. A natureza da luz: princípios de mecânica quântica
 - c. Estrutura eletrônica das moléculas: uma breve revisão
 - d. Transições eletrônicas em compostos de coordenação: regras de seleção,

transições proibidas por spin e por simetria, o princípio de Franck-Condon, Lei de Lambert-Beer.

e. Transições eletrônicas em óxidos metálicos: teoria de bandas

2. Processos Fotofísicos

a. Transições radiativas e não radiativas

b. Acoplamento spin-órbita e efeito do átomo pesado

c. Processos de transferência de energia: aspectos termodinâmicos e cinéticos

d. Supressão de luminescência: aspectos cinéticos

e. Técnicas experimentais para avaliação de processos fotofísicos: espectroscopia de emissão estacionária e resolvida no tempo; determinação de tempo de vida e rendimento quântico; efeito da temperatura nos processos emissivos.

3. Processos Fotoquímicos

a. Reações fotoquímicas: correlação com a natureza do estado excitado

b. Aspectos termodinâmicos e cinéticos das reações fotoquímicas

c. Reações fotoquímicas em compostos de coordenação: fotossubstituição, fotoisomerização em complexos metálicos.

d. Transferência eletrônica fotoinduzida: termodinâmica; cinética; teoria de Marcus; região invertida.

e. Transferência eletrônica em sistemas heterogêneos: óxidos metálicos, nanopartículas; aspectos cinéticos e termodinâmicos.

4. Aplicações atuais da Fotoquímica Inorgânica

- a. Dispositivos emissores de luz
- b. Fotochaveadores e fotossensores
- c. Fotocatálise homogênea e heterogênea
- d. Dispositivos para conversão de energia solar.

BIBLIOGRAFIA BÁSICA

1. GIBERT, A.; BAGGOTT, J. Essentials of Molecular Photochemistry. 1a.ed. Backwell Scientific, Oxford, 1991.
2. HUHEEY, J. E. Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity. 4a. ed. Harper e Row, London, 1993.
3. HOUSECROFT, C.; SHARPE, A. G. Química Inorgânica. 4a. ed. Rio de Janeiro: LTC - Livros Técnicos e Científicos Editora Ltda, 2013.
4. TURRO, N. J. Modern Molecular Photochemistry. University Science Books, 1991.

BIBLIOGRAFIA COMPLEMENTAR


1. BALZANI, V.; SCANDOLA, F. Supramolecular Photochemistry. West Sussex: Ellis Horwood Ltd, 1991.
2. FERRAUDI, G. J. Elements of Inorganic Photochemistry. New York: Willey Interscience Pub., 1988.
3. KALYANASYNDARAN, K. Photochemistry of Polypyridine and Porphyrin complexes. London: Academic Press, 1992.
4. KETTLE, S. F. A. Symmetry and Structure: Readable Group Theory for Chemists. 2a ed. New York: Willey Interscience Pub., 1995
5. SCHANZE, K.; RAMAMURTHY V. Molecular and Supramolecular


Photochemistry. vol. 1-9, CRC Press, 2019.

6. Artigos selecionados de periódicos científicos específicos.

aprovação

Rodrigo Alejandro Abarza Muñoz Coordenador do PPGQUI	Fábio Augusto do Amaral Diretor do IQUFU
---	---

	Documento assinado eletronicamente por Rodrigo Alejandro Abarza Munoz, Coordenador(a) , em 02/07/2021, às 15:32, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015 .
---	---

	A autenticidade deste documento pode ser conferida no site https://www.sei.ufu.br/sei/controlador_externo.php?acao=documento_conferir&id_orgao_acesso_externo=0 , informando o código verificador 2830125 e o código CRC B52F1AA4 .
---	--

Referência: Processo nº 23117.036831/2021-41	SEI nº 2830125
--	----------------